

H30 参考問題



- (1) 上の図に示された湯のみがある。以下の問いに答えよ。
 - (イ) 湯のみの形に対応する点群を答えよ
 - (ロ) 湯のみの模様に対応する二次元結晶群を答えよ。
 - (ハ) 鉛直方向と水平方向に連続する模様に対応するフリーズ群をそれぞれ答えよ。
ただし、クジラとネッシーは無視してよい。
- (2) ポテンシャルエネルギー面上の極小と鞍点に共通する性質は何か？
- (3) 二つの断熱ポテンシャルの交差に際して相互作用 v があれば、ポテンシャルエネルギー面は交差回避する。この交差回避点でのエネルギーギャップは $2v$ になることが知られている。このことを証明せよ。
- (4) 基準振動を計算するためには、まず構造最適化を行い、ついでエネルギーの二次微分計算する。構造最適化を行う理由について説明せよ。